

Ionbombázás indukált változások vizsgálata molekula dinamikai szimulációval

Az elmúlt 5 évben (2002-06) a következő munkákat végeztem el:

Sikerült kidolgozni fém-fém határfelületi rendszerekre atomisztikus molekula dinamikai szimulációs eljárást. A módszert alkalmaztam alacsony energiás (keV) ion-bombázás során előálló atomi folyamatmodellezésére. Sajnos a program fejlesztési munkák sok időt vittek főleg a 2002-04-es években, így az eredmények csak az otka periódus végén kezdenek csak mutatkozni.

Az eljárást több birétegre is elvégeztem (Ti/Pt, Al/Pt). Az atomi keveredési folyamatokat vizsgáltam a határfelület mentén. Azt találtam, hogy a várakozással ellentétben a keveredés mértéke nem érzékeny a heteronukleáris kölcsönhatási potenciál erősségére. Ez meglepő eredménynek bizonyult, ami nem illeszthető be az irodalomban elfogadott konvencionális képbe, amely szerint a ion-keveredés függ az ún. keveredési hőtől (ami arányos a kölcsönhatás erősségével (3 NIMB-es cikk, 2003-04)

Ez vezetett minket arra, hogy további vizsgálatokra van szükség az anomália tisztázására. Egy Phys. Rev. B cikkben (2005) sikerült megállapítanunk, hogy a ion-keveredés a birétegek tömeganisotropiájával nemlineárisan skálázódik. Azaz erősen anizotróp rendszerekben erős keveredés alakul ki. A folyamat ily módon a ballisztikus modell szerint írható le, ami azt sugallja, hogy az ütközési kaszkádokban meggy végbe a keveredés zöme és amit nem befolyásolhat a keveredési hő.

Al felületének ionbombázás által való durvulását vizsgáltam MD-vel, és azt találtam a kísérleti eredményekkel egyezésben, hogy nanopöttyök alakulnak ki ultragyors nukleációval (SUCI cikk, 2005).

A kutatási periódus második részében az ion-porlasztás szimulációs eljárásait fejlesztettem ki azzal a céllal, hogy a kísérletileg mért ion-kiszéledéssel összevethetők legyenek az eredmények. Az eredményeink jó egyezést mutatnak Cu/Co és Ti/Pt esetében a laborunkban kimért határfelületi kiszéledéssel. Két publikáció született (JAP, SIA, 2007).

Sikerült reprodukálni a Ti/Pt biréteg rendszerben talált érdekes keveredési asszimetriát. Pt/Ti birétegben jóval erősebb keveredést találtunk mint Ti/Pt-ban. A szimulációk jól hozzák a mérési adatokat és azt sugallják, hogy Pt/Ti-ban tranziens felerősödése történik a keveredésnek, ami egy elnyúló farokként jelenik meg a koncentráció profilban.

A Phys. Rev. B-nél elbírálás alatt áll egy kézirat, amelyben azt vizsgáljuk, hogy miként erősödhet fel a Pt atomok transzportja Pt/Ti-ban. Arra jutottunk, hogy egyfajta szuperdiffúziós folyamat megy végbe, amelynek fő jellemzője, hogy az atomi elmozdulás négyzetek összege nemlineárisan skálázódik az idővel. Nem találtunk ilyen skálázódást Ti/Pt-ban.

További eredmények: Felületi ötvöződés ill. film növekedés szimulációját végeztem el Pt/Al párra. Phys. Rev. B-ben elbírálás alatt áll egy kéziratom, amelyben érdekes (anomális) mechanizmust írtam le szimulációval. Ennek lényege az, hogy a 0 K hőmérsékletű Al felületére helyezett Pt atom ultra gyors módon bediffundál a Al szubsztrát legfelső rétege alá. A tranziens folyamat magyarázata kissé bonyolult, de úgy tűnik hogy kinetikusan vezérelt atomi keveredésről van szó. Azaz a Pt az Al felület felé gyorsulva jelentős kinetikus energiára tesz szert (2 eV) ami elégnek bizonyul az extrém módon alacsony hőmérsékleten való bekeveredéshez.

Nanoklaszter süllyedés szimulációja:

A legújabb eredmények azt mutatják, hogy hasonló tranziens folyamatok állnak elő atomfűrtök esetében is: ha pl. Pt nanoklasztert gyorsítunk 1 eV/atom energiával Al szubsztrátra, a klaszter süllyedését tapasztaljuk közel konstans sebességgel. Tehát ahelyett, hogy megállna az atomfűrt, vagy szétesne a felületen (ez lenne a várható folyamat) belesüllyed az Al hordozóba, mintha vízbe ejtenék egy tárgyat. Ráadásul erős asszimetriát is mutat a folyamat: Al klaszter "normálisan" viselkedik Pt hordozón, azaz a felületen marad becsapódás után.

Publikációk (2003-2007):

1. P. Süle, M. Menyhárd, L. Kótis, J. Lábár, J. F. Egelhoff Jr., J. Appl. Phys., **101**, 043502 (2007). *Asymmetric transient enhanced intermixing in Pt/Ti*
2. P. Süle, M. Menyhárd, Surf. Interface. Analysis, (2007), megjelenés alatt
EXPERIMENTAL AND THEORETICAL DETERMINATION OF MIXING EFFICIENCY OF LOW ENERGY AR+ BOMBARDMENT OF Cu/Co INTERFACE.
3. P. Süle, M. Menyhárd, Diff. and Defect Forum, (2007), *Intermixing in Cu/Co: molecular dynamics simulations and Auger electron spectroscopy depth profiling*
4. P. Süle, M. Menyhárd, L. Kótis, J. Lábár, J. F. Egelhoff Jr., in Science and Supercomputing in Europe, HPC-Europa, p. 788., report 2005, (2006), *Interface anisotropy induced asymmetry of intermixing in bilayers*
5. P. Süle, M. Menyhárd, Phys. Rev., **B71**, 113413 (2005),
Strong mass effect on ion-beam mixing in metal bilayers: A ballistic picture
6. P. Süle, Surf. Sci., **585**, 170 (2005),
Substrate induced enhancement of atomic layer growth on Al(111): The effect of the mass anisotropy
7. P. Süle, M. Menyhárd, K. Nordlund, Nucl Instr. and Meth. in Phys. Res., **B211**, 524 (2003), *Does the thermal spike affect low energy ion-induced interfacial mixing?*
8. P. Süle, M. Menyhárd, K. Nordlund, Nucl Instr. and Meth. in Phys. Res.,

B222, 525 (2004),

Cooperative mixing induced surface roughening in bilayer metals: a possible novel surface damage mechanism

9. P. Süle, M. Menyhárd, K. Nordlund, Nucl Instr. and Meth. in Phys. Res.,

B226, 517 (2004), *What is the real driving force of bilayer ion beam mixing?*

10. C. Ambrosch-Draxl, P. Süle, H. Auer, and E. Ya. Sherman

Phys. Rev. **B67**, 100505 (2003),

Doping-induced charge redistribution in the high-temperature superconductor HgBa₂CuO₄+?

További beküldött cikkek:

P. Süle, M. Menyhárd, Phys. Rev. B,

www.mfa.kfki.hu/~sule/papers/ptti.pdf.

Fingerprint of anomalous intermixing in Pt/Ti

P. Süle, Phys. Rev. B,

www.mfa.kfki.hu/~sule/papers/PRB07.pdf.

Size-mismatch induced transient enhanced intermixing

P. Süle, *Transient enhanced nanocluster burrowing*, Phys. Rev. Lett.

beküldés előtti kéziratok:

P. Süle, M. Menyhárd, L. Kótis, J. Lábár, J. F. Egelhoff Jr., SIA,

Asymmetric transient enhanced mixing in Co/Ti

P. Süle, *Superdiffusive atomic transport of heavy particles in bulk materials*